

Kap. IV QM in einer Räumliche Dimension (1D).

- 1) Der Harmonische Oszillator → Kohärente Zustände (Übungen)
- 2) Potentialstufe (1D Streuung).
- 3) Potentialbarriere (Tunnel Effekt).
- 4) Potentialtopf (Gebundene Zustände)
- 5) Periodische Potentiale (Bloch Theorem und Krönig-Penny Modell).

1) Der Harmonischer Oszillator (1d)

$$\hat{H} = \frac{\hat{P}^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2} \hat{X}^2$$

Zu lösen: $\hat{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$ mit $\langle\psi|\psi\rangle=1$

Abstieg, aufstieg Operatoren:

$$\hat{a} = \frac{\omega m \hat{X} + i \hat{P}}{\sqrt{2\omega m \hbar}} \quad \hat{a}^+ = \frac{\omega m \hat{X} - i \hat{P}}{\sqrt{2\omega m \hbar}} \quad \text{da } [\hat{P}, \hat{X}] = \frac{\hbar}{i} \text{ gilt } [\hat{a}, \hat{a}^+] = 1$$

Invertierung,

$$\hat{X} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega m}} (\hat{a} + \hat{a}^+) \quad \hat{P} = \frac{1}{i} \sqrt{\frac{\omega m \hbar}{2}} (\hat{a} - \hat{a}^+)$$

so dass:

$$\hat{H} = \hbar \omega \left(\hat{a}^+ \hat{a} + \frac{1}{2} \right)$$

$$\hat{n} = \hat{a}^+ \hat{a}$$

Ist Hermitesch und heißt Besetzungszahloperator

Eigenvektoren von \hat{n} bilden VONS. $\hat{n} |\psi_\nu\rangle = \nu |\psi_\nu\rangle \quad \nu \geq 0$

Grundzustand:

$$\hat{n} |\psi_0\rangle = 0, \quad \psi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{x_0} \sqrt{\pi}} e^{-x^2/2x_0^2} \quad x_0 = \sqrt{\hbar/2m}$$

Angeregte Zustände.

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n!}} (\hat{a}^+)^n |\psi_0\rangle, \quad \hat{n} |\psi_n\rangle = n |\psi_n\rangle \Rightarrow \hat{H} |\psi_n\rangle = \hbar\omega(n + 1/2) |\psi_n\rangle, \quad n = 1, 2, \dots, \infty$$

Bem: 1) $\langle x | \psi_n \rangle = \psi_n(x)$ bildet VONS von $\mathcal{L}^2(\mathbb{R})$

2) Ortsraumdarstellung von $\psi_n(x)$

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\sqrt{n! 2^n x_0 \sqrt{\pi}}} e^{-x^2/2x_0^2} H_n(x/x_0)$$

$H_0(x) = 1, H_1(x) = 2x, H_2(x) = 4x^2 - 2, \dots$ Hermite Polynome

$$3) |\psi_n\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a}^+ |\psi_{n-1}\rangle, \quad |\psi_{n-1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}} \hat{a} |\psi_n\rangle, \quad \hat{a} |\psi_0\rangle = 0$$

4) Ehrenfest Theorem.

$$\frac{d^2}{dt^2} \langle \hat{X} \rangle(t) = -m\omega^2 \langle \hat{X} \rangle(t) \Rightarrow \langle \hat{X} \rangle(t) = A \cos(\omega t + \delta)$$

Wie beim klassischen Fall.

Frage : Für welche Zustände gilt $\langle \hat{X} \rangle(t) = A \cos(\omega t + \delta)$?

Antwort: Kohärente Zustände:

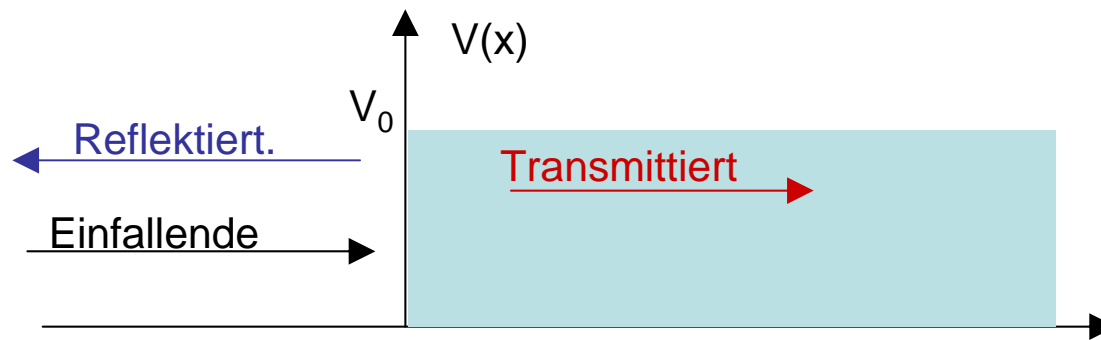
$$|\psi_\alpha\rangle = e^{-|\alpha|^2/2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\alpha^n}{\sqrt{n!}} |\psi_n\rangle, \quad \langle \psi_\alpha | \psi_\alpha \rangle = 1, \quad \hat{a} |\psi_\alpha\rangle = \alpha |\psi_\alpha\rangle, \quad \alpha \in \mathbb{C}$$

$$|\psi_\alpha(t)\rangle = e^{-i\omega t/2} |\psi_{\alpha(t)}\rangle, \quad \alpha(t) = \alpha e^{-i\omega t}$$

$$\langle \hat{X} \rangle(t) = \langle \psi_\alpha(t) | \hat{X} | \psi_\alpha(t) \rangle = \sqrt{2} x_0 |\alpha| \cos(\omega t + \delta),$$

$$x_0 = \sqrt{\frac{\hbar}{\omega m}}, \quad \alpha = |\alpha| e^{i\delta}$$

2) Potential-Stufe.



Zu lösen:
$$-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} \psi(x) + V(x) \psi(x) = E \psi(x) \quad \text{Stationäre Schrödinger Gleichung.}$$

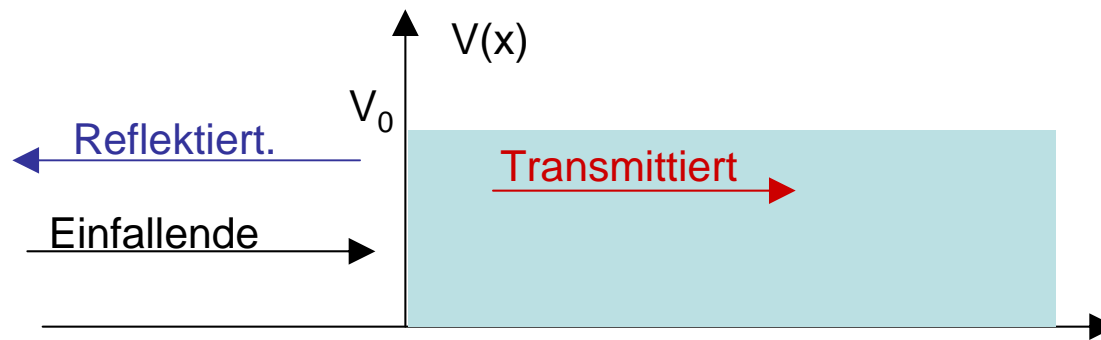
Bedingungen $|V(x)|, |\psi(x)|, |E| < \infty \Rightarrow \psi(x), \frac{d}{dx} \psi(x)$ sind stetig

Ansatz.
$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R e^{-ikx}, & x < 0, & k = \sqrt{2mE} / \hbar \\ T e^{iqx}, & x > 0, & q = \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar \end{cases}$$

Lösung.
$$R = \frac{k - q}{k + q} = \frac{\sqrt{E} - \sqrt{E - V_0}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}}, \quad T = \frac{2k}{k + q} = \frac{2\sqrt{E}}{\sqrt{E} + \sqrt{E - V_0}}$$

Bemerkung.
$$\frac{\partial}{\partial t} \underbrace{|\psi(x,t)|^2}_{=\rho(x,t)} + \nabla \left[\underbrace{\frac{i\hbar}{2m} \left\{ (\nabla \psi(x,t))^* \psi(x,t) - \psi(x,t)^* \nabla \psi(x,t) \right\}}_{=j(x,t)} \right] = 0$$

Stationäre Zustand, ein Dimension $\Rightarrow j(x,t) = \text{Wahrscheinlichkeitsstrom} = \text{Konstant !}$



$$\psi(x) = \begin{cases} e^{ikx} + R e^{-ikx}, & x < 0, \\ T e^{iqx}, & x > 0, \end{cases} \quad \begin{aligned} k &= \sqrt{2mE} / \hbar \\ q &= \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar \end{aligned} \quad R = \frac{k - q}{k + q}, \quad T = \frac{2k}{k + q}$$

$$E > V_0$$

$$E < V_0$$

$$q \in \mathbb{R}$$

$$j_t / j_0 = \frac{q}{k} |T|^2$$

$$j_r / j_0 = |R|^2$$

$R \in \mathbb{R}$ Keine Phase Verschiebung zwischen einfallende und reflektiert Welle.

QM Teilchen kann reflektiert werden sogar wenn $E > V_0$

$$q = i\kappa, \quad \kappa \in \mathbb{R}$$

Wellenfunktion $x > 0$ ist exponentiell unterdrückt.

$$j_t = 0$$

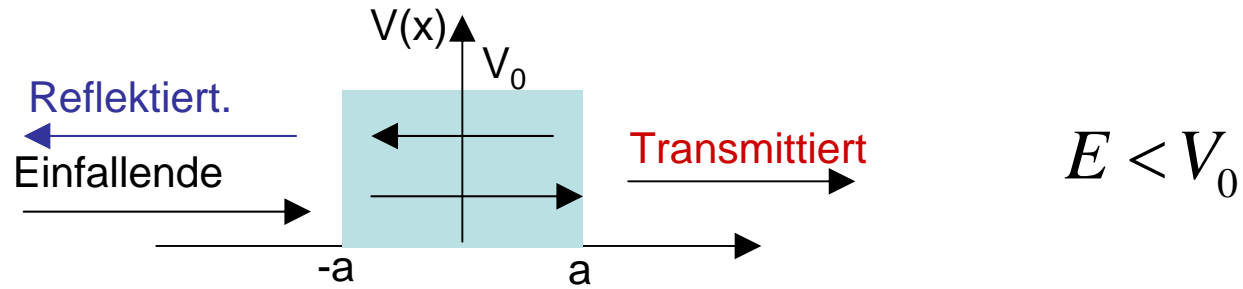
$$j_r / j_0 = |R|^2 = 1 \quad \text{Total-Reflektion.}$$

$$R \in \mathbb{C}$$

$$R = e^{-2i\delta} \quad \delta = \arctan \left(\sqrt{\frac{|E - V_0|}{E}} \right)$$

Phaseverschiebung.

Tunnel Effekt.



$$\psi(x) = \begin{cases} A e^{ik(x+a)} + B e^{-ik(x+a)} & x < -a \\ C e^{iqx} + D e^{-iqx} & -a < x < a \\ T e^{-ik(x-a)} & x > a \end{cases} \quad \begin{aligned} k &= \sqrt{2mE} / \hbar \\ q &= \sqrt{2m(E - V_0)} / \hbar = i\kappa \end{aligned}$$

Stetigkeit von $\psi(x)$, $\psi'(x)$

Transmissionswahrscheinlichkeitsamplitude.

$$T(E)/A(E) = S(E) = \frac{2ik\kappa}{2ik\kappa \cosh(2\kappa a) + (k^2 - \kappa^2) \sinh(2\kappa a)} \neq 0$$

Teilchen befindet sich für Zeitskala Δt im potential Barriere. Während dieser Zeitskala ist

$$\Delta E \geq \frac{\hbar}{2 \Delta t}$$

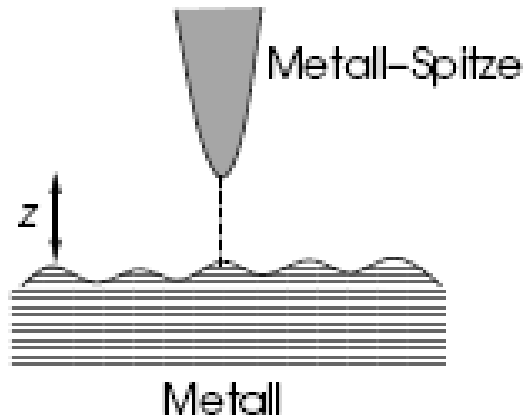
Scanning tunneling Microscope. STM.

Tunnel Barriere groß: =>

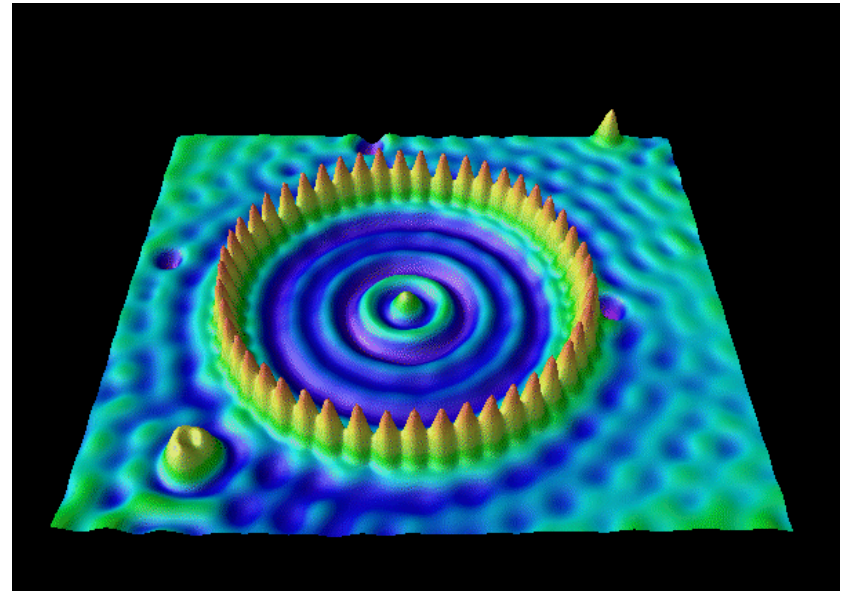
$$|S(E)|^2 \approx 16 \frac{E}{V_0} \left(1 - \frac{E}{V_0}\right) e^{-4\kappa a}$$

Starke Abhängigkeit von a .

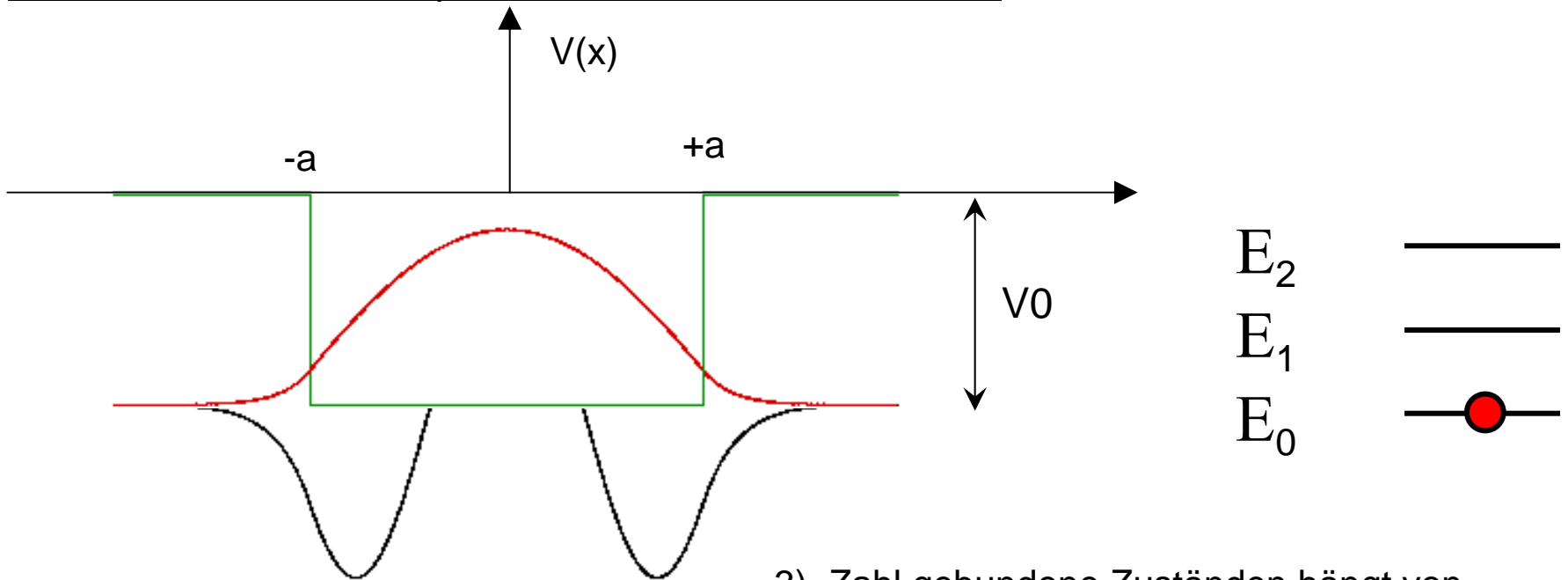
Tunnelraster-Mikroskop



Eisen auf Kupfer Oberfläche.



Teilchen im Potentialtopf, Gebundene Zustände $E < 0$.



- 1) Grundzustand hat keine Knotenpunkt.
- 2) Mit aufsteigender Energie nimmt Anzahl von Knotenpunkten zu.

- 3) Zahl gebundene Zuständen hängt von breite und tiefe des Potentialstopf.
- 4) Es gibt immer einen gebundene Zustand.

Lösung Vereinfacht durch Symmetrie Betrachtungen. Parität.

$$\hat{P}|x\rangle = |-x\rangle, \quad \hat{P}|p\rangle = |-p\rangle$$

$$\hat{P}^+ = \hat{P}, \quad \hat{P}^2 = 1, \quad \hat{P}|\xi\rangle = \xi|\xi\rangle \Rightarrow \xi = \pm 1, \quad \hat{P}\hat{X}\hat{P} = -\hat{X}, \quad \hat{P}\hat{P}\hat{P} = -\hat{P}$$

$$[\hat{H}, \hat{P}] = 0$$

Eigenzustände von H können gleichzeitig Eigenzustände von Parität sein.

4) Periodische Potentiale.

$$\hat{H} = \hat{P}^2 / 2m + V(\hat{X})$$

$$V(x + na) = V(x) \quad n \in \mathbb{N}$$

Translations Operator.

$$\hat{T}_a = e^{-i\hat{P}a/\hbar} \quad \hat{P} : \text{Impuls Operator.}$$

$$\hat{T}_a |x\rangle = |x + a\rangle, \quad [\hat{T}_a, \hat{H}] = 0 \quad \underline{\text{Eigenzustände von H können gleichzeitig Eigenzustände von Translationsoperator sein.}}$$

$$\hat{T}_a : \text{Ist unitär.} \Rightarrow \hat{T}_a |\psi_k\rangle = \lambda_k |\psi_k\rangle, \quad |\lambda_k|^2 = 1 \Rightarrow \lambda_k = e^{-ika}$$

Im Ortsraum gilt:

$$\langle x | \psi_k \rangle = \psi_k(x) = e^{ikx} u_k(x), \quad u_k(x + na) = u_k(x)$$

(Bloch Theorem).

Krönig-Penny Modell.

$$V(x) = V_0 \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x - na)$$

Bem: Anschlussbedingungen für $V(x) = V_0 \delta(x - x_0)$:

$$\psi(x) \text{ stetig.} \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi'(x_0 + \varepsilon) - \psi'(x_0 - \varepsilon) = 2mV_0\psi(x_0) / \hbar^2$$

Ansatz zur Lösung stationäre Schr. Gleichung zur Energie E und Translationsoperator
Eigenwert $\exp(-ika)$:

$$\psi(x) = A_n e^{iqx} + B_n e^{-iqx} \quad \text{mit} \quad q = \sqrt{2mE} / \hbar, \quad na \leq x < (n+1)a$$

$$\Rightarrow u(x) = e^{-ikx} \psi(x)$$

Forderungen:

$$1) \quad u(x+a) = u(x) \quad \Rightarrow$$

$$A_n = A_0 e^{-i(q-k)na}, \quad B_n = B_0 e^{i(q+k)na}$$

$$2) \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi(na + \varepsilon) - \psi(na - \varepsilon) = 0 \quad \Rightarrow$$

$$\left(1 - e^{i(q-k)a}\right) A_0 + \left(1 - e^{-i(q+k)a}\right) B_0 = 0$$

$$3) \quad \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \psi'(na + \varepsilon) - \psi'(na - \varepsilon) = \frac{2mV_0}{\hbar^2} \psi(na) \quad \Rightarrow$$

$$\left(iq - iqe^{i(q-k)a} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right) A_0 + \left(-iq + iqe^{-i(q+k)a} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right) B_0 = 0$$

Nicht Triviale Lösung falls:

$$\det \begin{pmatrix} (1 - e^{i(q-k)a}) & (1 - e^{-i(q+k)a}) \\ \left(iq - iqe^{i(q-k)a} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right) & \left(-iq + iqe^{-i(q+k)a} - \frac{2mV_0}{\hbar^2} \right) \end{pmatrix} = 0$$

$$\cos(ka) = \cos(qa) + \frac{2maV_0}{\hbar^2} \frac{\sin(qa)}{qa}$$

Für Gegebenes k gibt es nur Diskrete Werte von q

